

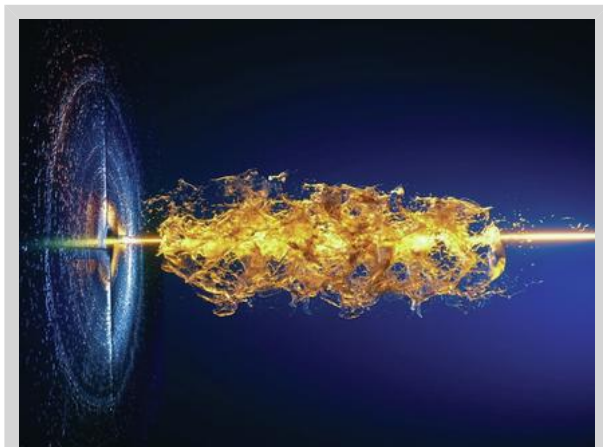


>> <https://www.quimica.es/noticias/1174434/>

## Cristalografía para los cristales inadaptados

Algoritmos avanzados y un excepcional láser de rayos X pueden revelar las estructuras de materiales no tan limpios que no se pueden alcanzar con otras técnicas

**24.01.2022** - Francis Crick, famoso por haber descubierto la forma del ADN, dijo una vez: "Si quieres entender la función, estudia la estructura". Muchas décadas después, esta frase sigue siendo un principio de la biología, la química y la ciencia de los materiales.



Ella Maru Studio

Una ilustración del chorro de disolvente líquido, las partículas de la muestra y el haz del acelerador que captura los datos de difracción en un proceso que sólo dura unos pocos femtosegundos, es decir, una cuatrillonésima de segundo, o, una millonésima de millonésima de segundo.

Un avance clave en la búsqueda de la estructura del ADN fue la cristalografía de rayos X, una técnica que mapea la densidad de electrones en una molécula basándose en la forma en que los haces

de radiación de rayos X se difractan a través de los espacios entre los átomos de la muestra. Los patrones de difracción generados por la cristalografía pueden utilizarse entonces para deducir la estructura molecular global. Gracias a un flujo constante de avances a lo largo de las décadas, la cristalografía de rayos X es ahora exponencialmente más potente que en la época de Crick, y puede incluso revelar la ubicación de átomos individuales.

Sin embargo, el proceso no es fácil. Como su nombre indica, requiere cristales, en concreto, muestras purificadas de la molécula de interés, que se convierten en cristales. Y no todas las moléculas forman cristales listos para ser fotografiados.

"La cristalografía de rayos X es más sencilla cuando el material puede crecer hasta convertirse en un gran cristal único", explica Nicholas Sauter, científico principal de informática del Laboratorio Nacional Lawrence Berkeley (Berkeley Lab), en la división de Biofísica Molecular y Bioimagen Integrada (MBIB). "Sin embargo, la mayoría de las sustancias forman en cambio polvos compuestos por pequeños gránulos, cuyos patrones de difracción de rayos X son más difíciles de desentrañar".

Sauter codirige un equipo que trabaja para proporcionar una mejor manera de que los científicos es-



>> <https://www.quimica.es/noticias/1174434/>

tudien las estructuras de los muchos materiales que no forman cristales individuales ordenados, como los absorbentes solares y los marcos metal-orgánicos: dos grupos de materiales diversos con un enorme potencial para combatir el cambio climático y producir energía renovable.

Su nueva técnica, denominada cristalografía de rayos X de femtosegundos en serie de moléculas pequeñas, o smSFX, sobrecarga la cristalografía tradicional con la adición de algoritmos de procesamiento de imágenes hechos a medida y un láser de electrones libres de rayos X (XFEL). El XFEL, construido a partir de la fusión de un acelerador de partículas y de la física basada en el láser, puede dirigir haces de rayos X mucho más potentes, concentrados y rápidos que otras fuentes de rayos X para la cristalografía. Todo el proceso, desde el pulso de rayos X hasta la imagen de difracción, se completa en unas cuatrillonésimas de segundo.

"Es la difracción antes de la destrucción", afirma Daniel Paley, científico del proyecto MBIB y autor del nuevo artículo del equipo, publicado en Nature. "La idea es que el cristal va a explotar instantáneamente cuando es golpeado por este haz de fotones, pero con un pulso de femtosegundos, se recogen todos los datos de difracción antes de que se produzca el daño. Es realmente genial".

Paley y el co-líder Aaron Brewster, científico investigador en el MBIB, desarrollaron los algoritmos necesarios para convertir los datos del XFEL en patrones de difracción de alta calidad que pueden ser analizados para revelar la celda unitaria -la unidad básica de un cristal que se repite una y otra vez en

tres dimensiones- de cada diminuto grano cristalino dentro de la muestra.

Cuando se tiene un polvo verdadero, explicó Paley, es como tener un millón de cristales que están todos mezclados, llenos de imperfecciones y revueltos en todas las orientaciones posibles. En lugar de difractar todo el revoltijo y obtener una lectura confusa de las densidades de electrones, como ocurre con las técnicas de difracción de polvos existentes, smSFX es tan preciso que puede difractar gránulos individuales, de uno en uno. "Esto le confiere un efecto especial de nitidez", afirma. "Así que esa es en realidad la especie de salsa secreta de todo este método. Normalmente se disparan todos los millones a la vez, pero ahora se disparan 10.000 todos en secuencia".

La guinda del pastel es que el smSFX se realiza sin congelar la muestra ni exponerla al vacío, otra ventaja para los delicados materiales que estudian los científicos de materiales. "No se necesita ninguna cámara de vacío de lujo", dijo Sauter.

En el nuevo estudio, el equipo demostró la prueba de principio de la smSFX y luego dio un paso más. Presentaron las estructuras, hasta entonces desconocidas, de dos materiales metal-orgánicos conocidos como chacogenolatos. Nathan Hohman, físico químico de la Universidad de Connecticut y tercer codirector del proyecto, estudia los chacogenolatos por sus propiedades semiconductoras y de interacción con la luz, que podrían hacerlos ideales para transistores de próxima generación, fotovoltaicos



>> <https://www.quimica.es/noticias/1174434/>

cos (células y paneles solares), dispositivos de almacenamiento de energía y sensores.

"Cada uno de ellos es un copo de nieve especial; cultivarlos es realmente difícil", afirma Hohman. Con el smSFX, él y la estudiante de posgrado Elyse Schriber pudieron difractar con éxito los chocogenolatos en polvo y examinar las estructuras para saber por qué algunos de los materiales basados en la plata brillan en azul bajo la luz ultravioleta, un fenómeno que los científicos comparan cariñosamente con la espada de Frodo en El Señor de los Anillos.

"Hay una gran variedad de fascinantes dinámicas físicas e incluso químicas que se producen en escalas de tiempo ultrarrápidas, y nuestro experimento podría ayudar a conectar los puntos entre la estructura de un material y su función", dijo Schriber, un afiliado del Laboratorio de Berkeley e investigador en el laboratorio de Hohman. "Una vez que se realicen nuevas mejoras para agilizar el proceso de smSFX, podemos imaginar programas para ofrecer esta técnica a otros investigadores. Este tipo de programas son integrales para aumentar el acceso a las instalaciones de fuentes de luz, especialmente para las universidades y colegios más pequeños."

#### **Publicación original:**

*Schriber, E.A., Paley, D.W., Bolotovskiy, R. et al.; "Chemical crystallography by serial femtosecond X-ray diffraction"; Nature; 601, 360–365 (2022).*